

KCuF<sub>3</sub> の空間群が  $D_{4h}^{18}$  であることに基づき、ファクターグループ解析を行って、ラマン活性振動モードの既約表現が、 $A_{1g} + B_{1g} + 2B_{2g} + 3E_g$  であることを求めた。これらによる散乱スペクトルがそれぞれの偏光特性で観測された。それらのモードと振動数の同定を行い、各モードによるスペクトルのストークスシフト、散乱強度等の温度変化の定性的な説明を行った。

(2) マグノン・ラマン散乱

1 マグノン散乱は約  $8 \sim 10 \text{ cm}^{-1}$  に出ることが予想されたが、実験には観測されなかった。これは 1 マグノン散乱強度が、 $(H_A/2H_E)^{1/2}$  ( $H_A$ : 異方性,  $H_E$ : exchange) という因子に依存し、KCuF<sub>3</sub> ではこの因子が小さいためと考えられる。 $T_N = 38\text{K}$  以下で 2 マグノン散乱が 2 つの異なる偏光特性で観測された。このスペクトルにスピン波理論を適用して  $J_A/J_C$  の比を求めたところ、中性子散乱による結果とよく一致することがわかった。

5. 核スピン—格子緩和時間自動測定装置の製作と、それを用いた  
酸化物超伝導体  $\text{Li}_{1+x}\text{Ti}_{2-x}\text{O}_4$  の NMR

長谷川 安 昭

酸化物超伝導体  $\text{Li}_{1+x}\text{Ti}_{2-x}\text{O}_4$  は  $0 \leq x \leq 1/3$  でスピネル構造をとり、組成を変化させる事により  $x \sim 0.15$  で金属—絶縁体遷移を起こす事が知られている。また、その金属相 ( $0 \leq x < 0.15$ ) では  $T_c \sim 12\text{K}$  の超伝導転移をも示す。この金属相における抵抗率は  $x = 0$  と  $x = 0.1$  とで 2 桁以上の差があるが、このときの  $T_c$  はあまり変化せず、その電子状態に興味を持たれる。

そこで  $\text{Li}_{1+x}\text{Ti}_{2-x}\text{O}_4$  の金属相における電子スピン系の動的性質を調べる為に核スピン—格子緩和時間自動測定装置を製作して  $^7\text{Li}$  核の NMR の実験を行い、次の結果を得た。

(1)  $^7\text{Li}$  NMR の信号強度が、 $x$  の増加にしたがって減少している。

$\text{LiTi}_2\text{O}_4$  では、全ての Li は四面体サイトを占めるが、 $x \neq 0$  ではそれ以外に八面体サイトの Ti とランダムに置換された Li がある。観測された強度の減少は、八面体サイトに入った Li により周囲の Ti が局在モーメンを持ち、その速い緩和によってさらにその周辺の Li が観測されなくなる為であると考えられる。

- (2) 核スピン-格子緩和時間の温度変化は、高温域では  $T_1 T =$  一定の変化をするが、低温になると緩和関数が非線形になるとともに、 $1/T_1$  が増加する。高温での緩和は伝導電子によるが、低温での緩和は局在モーメントの揺らぎによると考えられる。
- (3)  $T \leq T_c$  では、渦糸状態が現われた事により、試料内に磁場の分布が生じた。その為、共鳴磁場のシフト、スペクトルの歪みが観測された。

## 6. スピン動力学シミュレーションの提案と化合物系における磁氣的諸性質の研究への応用

藤 本 憲 司

磁氣的に一様な系を作っている化合物磁性体において、局在スピンを持っているイオンを、他の磁氣的性質を持つイオンで置換していくと、磁氣的相互作用の競合が生じ、ランダム性が重要な寄与をする複雑な状態となる。スピングラス状態はその一例である。このような複雑な系の性質を計算物理的手法によって解明する手段として Monte Carlo シミュレーション (MCS) が従来行われてきたが、磁場の断熱的变化に対する系の応答とか、スピン共鳴現象のような動的性質に対しては、計算方法が確立されていない。そこで、我々は、このような動的側面を捕えることのできる有力な方法として、スピン動力学シミュレーション (SDS) を提案し、種々の系への適用を試みてきた。この計算方法は、分子動力学法に対応しており、各格子点上での各スピンの運動を運動方程式に従わせて動かしてゆく決定論的シミュレーションである。

適用例として、交換相互作用が競合する場合の 2次元 XY 系については吉原知樹のアブストラクトに述べられているように渦構造が出現する。また、交換相互作用競合 2次元ハイゼンベルク系では見かけ上ドメイン構造となるが、カイラリティは境界線上に局在している。これらの系の磁場に対する応答も調べた。

さらに新しい適用例として、異方性が競合する系の強磁性共鳴についても調べた。これは、山田勲らの Co-doped  $K_2CuF_4$  の FMR における共鳴スペクトルの異常な振舞いを説明できた。

公表した論文 (共著者: 夏目雄平, 吉原知樹) のリストは吉原のアブストラクトを参照されたい。